杜1

群对称网络电场及电阻求解方法

物理学院　杜宗哲

目录

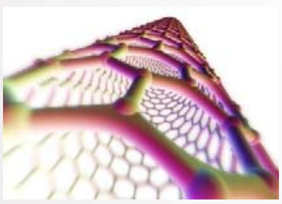
幻灯片 1

杜1 杜 宗哲, 2019/6/13

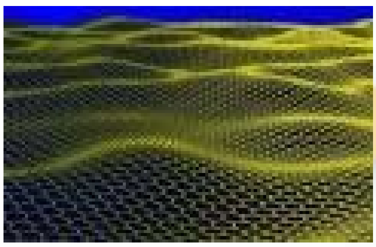
1.Lead to problem

1.Lead to problem

- 每当开发出一种新型材料，总是要研究它的导电性，以及这种材料在内部的电场是如何分布的。本次研究课题给出了一种对具有平移对称性的电阻网络电势及电阻的求解方法。



碳纳米管

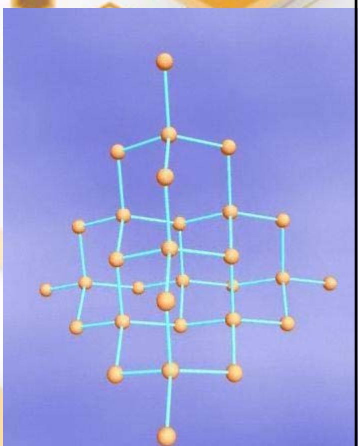


石墨烯

2.Dealing method

2.Dealing method

- 通过研究晶体，我们发现在晶体中，每一个晶胞相对其他晶胞都是对称的，这类问题就可以用数学中的<u>**群**</u>来描述。



金刚石晶胞

2.Dealing method

- 对于群中的每一个元素，都存在一组复特征基，即群到U(1)的同态映射（详见wiki特征基理论）

对于一维点群(N阶群)，复特征基为

$$\varphi_k(x) = e^{-i\frac{2\pi}{N}kx}$$

对于多个点群的直和

$$\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = e^{-i\sum\frac{2\pi}{N_i}k_i x_i}$$

显然特征基群是正交的

$$< \varphi_{\boldsymbol{k}} | \varphi_{\boldsymbol{k}'} >= \sum_{\boldsymbol{x}} e^{-i\frac{2\pi}{N}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{x}} = N^2\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$$

注意这里加粗的字体代表向量（节点）的坐标

2.Dealing method

- 由特征基理论，我们可以将群中每一个元素所对应的函数（当然我们这里要展开的就是电势）由特征基展开

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum F(\boldsymbol{k})\varphi_{\boldsymbol{k}}$$

我们的目的就是求出 $F(\boldsymbol{k})$

2.Dealing method

- 现在我们回到物理，由于每一个点都是相似的，我们可以对节点列出基尔霍夫方程

$$\sum \frac{V(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_l)-V(\boldsymbol{x})}{r_l}=I(\boldsymbol{x})$$

其中$I(\boldsymbol{x})$为节点流入的电流，$\boldsymbol{e}_l$会随着网络的不同而不同，比如正方形网格就是

$$\boldsymbol{e}_1=(1,0),\boldsymbol{e}_2=(0,1),\boldsymbol{e}_3=(-1,0),\boldsymbol{e}_4=(0,-1)$$

$$r_l=1$$

正三角型网格就是

$$\boldsymbol{e}_1=(1,0),\boldsymbol{e}_2=(0,1),\boldsymbol{e}_3=(-1,0),\boldsymbol{e}_4=(0,-1),\boldsymbol{e}_5=(1,-1),\boldsymbol{e}_6=(-1,1)$$

$$r_l=1$$

2.Dealing method

- 将展开式代入基尔霍夫方程，我们得到

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l}[\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{e}_l)-1]\,F(\boldsymbol{k})\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})=I(\boldsymbol{x})$$

记$\lambda_{\boldsymbol{k}}=\sum_l[\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{e}_l)-1]$（特征值），有

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\lambda_{\boldsymbol{k}}F(\boldsymbol{k})\varphi_{\boldsymbol{k}}=I(\boldsymbol{x})$$

2.Dealing method

- 两边同时内积$|\varphi_{k'}>$

$$\sum \lambda_{\boldsymbol{k}} F(\boldsymbol{k}) < \varphi_{\boldsymbol{k}} | \varphi_{\boldsymbol{k}'} > = < I(\boldsymbol{x}) | \varphi_{\boldsymbol{k}'} >$$

$$\lambda_{\boldsymbol{k}} F(\boldsymbol{k}) N^2 = - < I(\boldsymbol{x}) | \varphi_{\boldsymbol{k}} >$$

$$F(\boldsymbol{k}) = \frac{< \varphi_{\boldsymbol{k}} | I(\boldsymbol{x}) >}{\lambda_{\boldsymbol{k}} N^2}$$

我们求得了$F(\boldsymbol{k})$

2.Dealing method

- 所以最终每个节点的电势就是

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{< \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) | I(\boldsymbol{x}) >}{\lambda_{\boldsymbol{k}} N} \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

2.Dealing method

- 特别的，如果要求电阻，令

$$I(\boldsymbol{x}) = \delta(\mathbf{0}) - \delta(\boldsymbol{a})$$

电阻就是

$$R = V(\boldsymbol{a}) - V(\mathbf{0}) = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{|1 - \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})|^2}{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$$

Partial Conclusion

- 网络中任意点的电势

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{< \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) | I(\boldsymbol{x}) >}{\lambda_{\boldsymbol{k}} N} \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

任意点与原点的电阻

$$R = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{|1 - \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})|^2}{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$$

Partial Conclusion

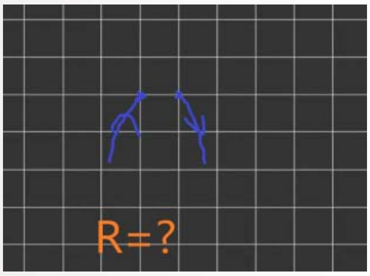
- 此前，晶体材料中的电场分布与任意两点间电阻并未有一个统一算法，上述公式为求解晶体间电场（电势）分布以及电阻提供了一个一般且简洁的方法
接下来就是看看这个电阻公式的威力了

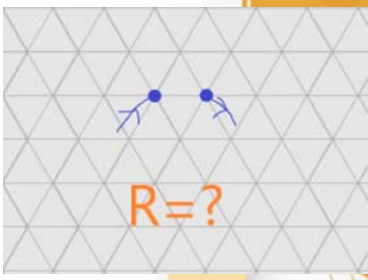
Show its POWER!

3.Applications

3.Applications

平面无穷大网络





现在我们来以左图为例，示范求解网络中任意两点电阻的方法

3.Applications

1.找到特征基

利用笛卡尔坐标系，由于x,y对称，求和可以写为点乘形式

$$\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = e^{-i\frac{2\pi}{N}\boldsymbol{k}.\boldsymbol{x}}$$

2.找到单位向量

$$\boldsymbol{e_1} = (1,0), \boldsymbol{e_2} = (0,1), \boldsymbol{e_3} = (-1,0), \boldsymbol{e_4} = (0,-1)$$

3.Applications

3.找到特征值

$$\lambda_{\boldsymbol{k}} = \sum_{l=1}^{4}(e^{-i\frac{2\pi}{N}\boldsymbol{k}.\boldsymbol{e}_l}-1) = \left(e^{i\frac{2\pi}{N}k_1} + e^{-i\frac{2\pi}{N}k_1} + e^{i\frac{2\pi}{N}k_2} + e^{-i\frac{2\pi}{N}k_2}\right) - 4$$

$$= 2(\cos\frac{2\pi}{N}k_1 + \cos\frac{2\pi}{N}k_2 - 2)$$

4.代入公式

$$R = \frac{-1}{N^2}\sum_{\boldsymbol{k}\in\{-\frac{N}{2},\frac{N}{2}\}^2}\frac{1-\cos(\frac{2\pi}{N}k_1 m + \frac{2\pi}{N}k_1 n)}{\cos\frac{2\pi}{N}k_1 + \cos\frac{2\pi}{N}k_2 - 2}$$

3.Applications

5.（选择性，若无穷则做，否则不做）取极限

$$R = \iint_{\{-\pi,\pi\}^2}\frac{1-\cos(k_1x+k_1y)}{4\pi^2(2-\cos k_1-\cos k_2)}\boldsymbol{dk}$$

显然

$$R(1,0) = \frac{1}{2}$$

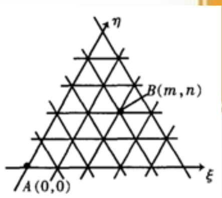
和我们用对称性求得的结果完全一样！

3.Applications

- 再来看三角网络

每个三角形边电阻为r_1,r_2,r_3

采用如图坐标系



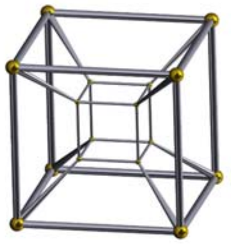
$$R=\frac{1}{4\pi^2}\int_{\{-\pi,\pi\}^2}\frac{1-\cos(k_1x+k_1y)}{\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}+\frac{1}{r_3}-[\frac{\cos k_1}{r_1}+\frac{\cos k_2}{r_2}+\frac{\cos(k_2-k_2)}{r_3}]}d^2k$$

3.Applications

- 注：前两个问题的求解均为波兰高中生Krzysztof Giaro 于1993年完成的，可以验证此公式的正确性。

接下来我们利用这个公式去解决一些未被解决过新的问题，并用一个例子验证它的正确性。

3.Applications



- N维立方体

在$\{0,1\}^N$的N维欧式空间中，立方体每条边连接一个值为1的电阻，求解任意两点间等效电阻。

$$R = V(\boldsymbol{a}) - V(\boldsymbol{0}) = \frac{1}{2^N}\sum_{i=1}^{2^N}\frac{|1-\varphi_i(\boldsymbol{a})|^2}{\sum_{l=1}^{N}(1-\varphi_i(\boldsymbol{e}_l))}$$

化简得

$$R = \frac{1}{2^{N-1}}\sum_{i=1, i\ is\ odd}^{k}\ \sum_{j=0}^{N-k}\frac{k!\,(N-k)!}{i!\,j!\,(i+j)(k-i)!\,(N-k-i)!}$$

3.Applications

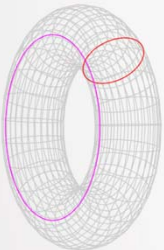
数值分析

前三维和我们所求完全一样，后面的维数有有兴趣的同学去查阅。

n/k	1	2	3	4	5	6	7
1	1.000000						
2	0.750000	1.000000					
3	0.583333	0.750000	0.833333				
4	0.468750	0.583333	0.635417	0.66667			
5	0.387500	0.468750	0.502083	0.716667	0.862500		
6	0.328125	0.387500	0.409375	0.420833	0.428125	0.433333	
7	0.283482	0.328125	0.342857	0.350000	0.354315	0.357292	0.359524

3.Applications

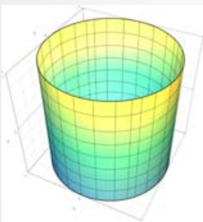
- 一个拓扑环面有 N 条经线，M条纬线
每个相邻节点连接一个单位电阻，求任意两点电阻



$$R = \frac{1}{NM}\sum_{k_2=0}^{N-1}\sum_{k_1=0}^{N-1}\frac{1-\cos(\frac{2\pi}{N}k_1 x + \frac{2\pi}{M}k_2 y)}{2-(\cos\frac{2\pi}{N}k_1 + \cos\frac{2\pi}{M}k_2)}$$

3.Applications

- 圆柱形有N条母线，无穷条圆圈，每个节点
连接一条单位电阻，求任意两点电阻



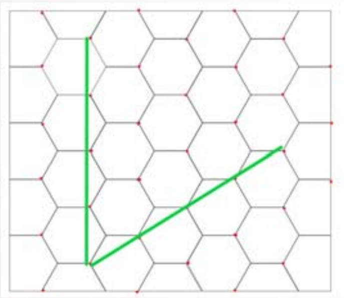
$$R = \frac{1}{2\pi N}\int_{-\pi}^{\pi}\sum_{k_1=0}^{N-1}\frac{1-\cos(\frac{2\pi}{N}k_1 x + k_2 y)}{2-(\cos\frac{2\pi}{N}k_1 + \cos k_2)}dk_1 dk_2$$

3.Applications 材料学应用

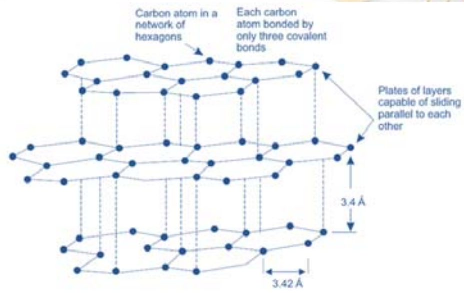
- 石墨

利用如下坐标系

并利用简单的Y-△变换可以得到



石墨



3.Applications

$$R(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{|1-\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})|^2}{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$$

$$= \frac{1}{8\pi^3} \int_{\{-\boldsymbol{\pi},\boldsymbol{\pi}\}^3} \frac{1-\cos(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{a})}{\left(2-\frac{1}{3}[\cos k_1 + \cos k_2 + \cos(k_2-k_1)] - \cos k_3\right)} d^3k$$

位于三角形内部的电阻

$$R = \frac{1}{3}[R(\boldsymbol{x}) + R(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_1) + R(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_2)]$$

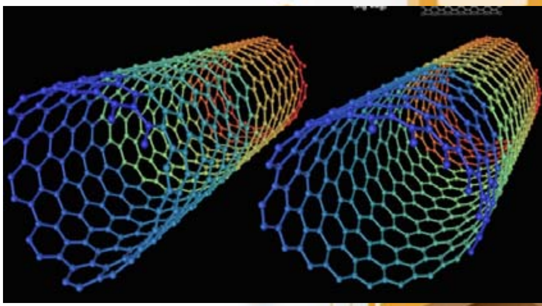
If the height z is odd, then

$$\boldsymbol{e}_1 = (1,0,0), \boldsymbol{e}_2 = (1,-1,0)$$

else

$$\boldsymbol{e}_1 = (1,0,0), \boldsymbol{e}_2 = (0,1,0)$$

3.Applications



- 碳纳米管

假设每一圈有N个正六边形
利用如上坐标系

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in network\ space}\frac{|1-\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})|^2}{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$$

$$= \frac{1}{2\pi N}\int_{-\pi}^{\pi}\sum_{k_2=0}^{N-1}\frac{1-\cos(\frac{2\pi}{N}k_2 y + k_1 x)}{2-\frac{1}{3}(\cos\frac{2\pi}{N}k_2 + \cos k_1 + \cos\left(\frac{2\pi}{N}k_2 - k_1\right))}dk_1$$

$$R_{inside(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e_1},\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e_2})} = \frac{1}{3}[R(\boldsymbol{x}) + R(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e_1}) + R(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e_2})]$$

其中

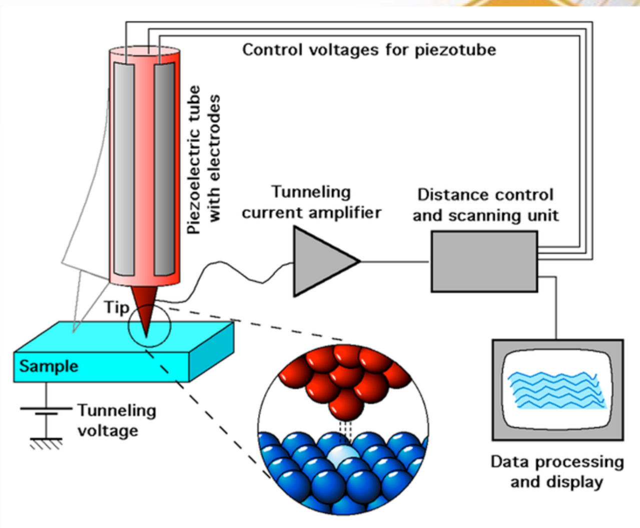
$$\boldsymbol{e_1} = (1,0), \boldsymbol{e_2} = (0,1)$$

3.Applications

对于写成化为点对称的循环群网络，总可以找到一种合适的电阻变换使得整个网络变成循环群网络

4.Applications prospect

- 现阶段，探测物质表面结构的最有效仪器当属扫描隧道显微镜。通过测量隧穿电流的大小，可以观察到原子级别的起伏，它是重要的纳尺度测量工具。



4.Applications prospect

- 然而扫描隧道显微镜并不能对物质内部的电场进行探测，这时就需要一个人为的计算公式来预测内部的电场。此次研究所提供的公式可作为在经典近似下材料内部电场的近似公式。

5.Conclusions

5.Conclusion

- 此次研究，我们给出了群网络任意两点电阻的一般公式，相比于传统的对称性分析，给出的公式具有着更高的普适性。更广泛的说，利用群特征基展开，我们可以求得给定电流分布任意节点的电势。再通过特定的电阻变换，**可以求解出几乎所有晶体材料的电阻以及电势分布。**此前对材料内部电场性质的研究采用的经验公式，可以就此终结了。

5.Conclusion

- 最后再把公式贴出来

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{< \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) | I(\boldsymbol{x}) >}{\lambda_{\boldsymbol{k}} N} \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

$$R = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k} \in network\ space} \frac{|1 - \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})|^2}{-\lambda_{\boldsymbol{k}}}$$

谢谢观看